

Máster en Programación avanzada en Python para Hacking, BigData y Machine Learning

Fundamentos de IA y Machine Learning

LECCIÓN 03

Modelos de Regresión y Clasificación I

ÍNDICE

- ✓ Introducción
- ✓ Regresión Lineal
- ✓ Regresión Logística
- ✓ Algoritmo de los k vecinos más cercanos
- ✓ Árboles de decisión

INTRODUCCIÓN

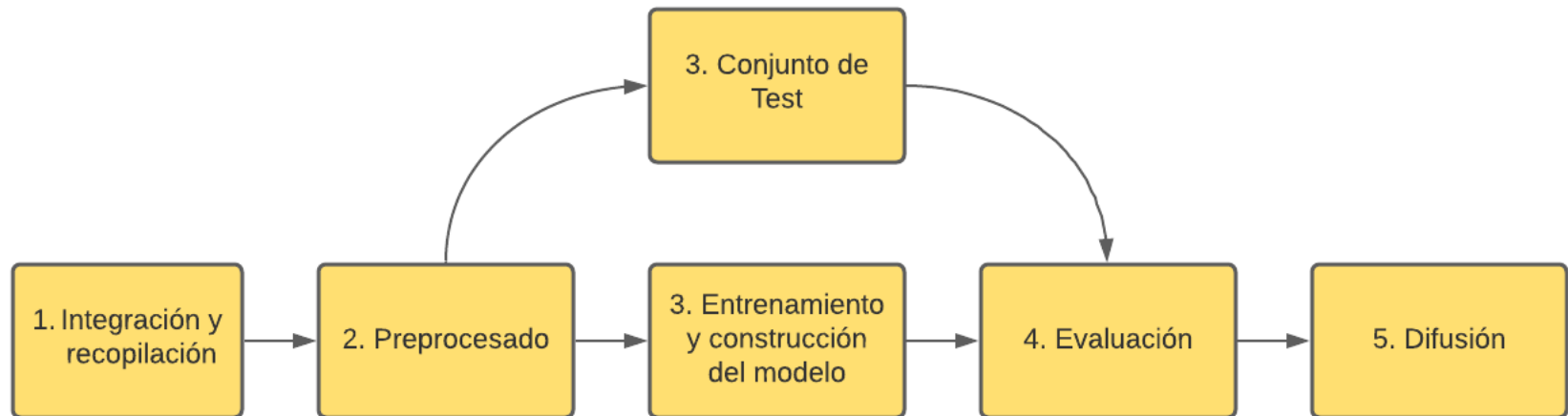
Una vez que conocemos las técnicas de entrenamiento y evaluación, es el momento de exponer distintos modelos de aprendizaje automático y los algoritmos utilizados para su entrenamiento.

OBJETIVOS

Al finalizar esta lección serás capaz de:

- 1 Generar, entrenar e interpretar un modelo de regresión.
- 2 Conocer la adaptación de la regresión para su uso en problemas de clasificación.
- 3 Utilizar el algoritmo de los k vecinos más cercanos (*K-nearest neighbours, KNN*).
- 4 Modelar e interpretar árboles de decisión

1.1. Contextualización de la lección



1.2. Formulación de un problema de regresión

Cualquier problema de regresión se puede formular de la siguiente forma:

- Disponemos de un espacio de entrada X compuesto por patrones etiquetados con $Y \subseteq \mathbb{R}$.
- Cada patrón se representa por un vector de características de dimensión K , $x \in X \subseteq \mathbb{R}^K$ y un valor continuo $y \in Y \subseteq \mathbb{R}$.
- El objetivo es aprender una función f que relacione los datos del espacio de entrada X al conjunto de valores continuos finito Y .
- El conjunto de entrenamiento T está compuesto de N patrones:

$$T = (x_i, y_i): x_i \in X, y_i \in Y (i = 1, \dots, n), \text{ con } x_i = (x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,K}).$$

1.3. Formulación de un problema de clasificación

Cualquier problema de clasificación se puede formular de la siguiente forma:

- Disponemos de un espacio de entrada X compuesto por patrones etiquetados con $C = \{C_1, C_2, \dots, C_Q\}$ donde Q es el número de clases.
- Cada patrón se representa por un vector de características de dimensión K , $x \in X \subseteq \mathbb{R}^K$ y una etiqueta de clase $y \in C$.
- El objetivo es aprender una función f que relacione los datos del espacio de entrada X al conjunto finito C .
- El conjunto de entrenamiento T está compuesto de N patrones:

$$T = (x_i, y_i): x_i \in X, y_i \in C (i = 1, \dots, n), \text{ con } x_i = (x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,K}).$$

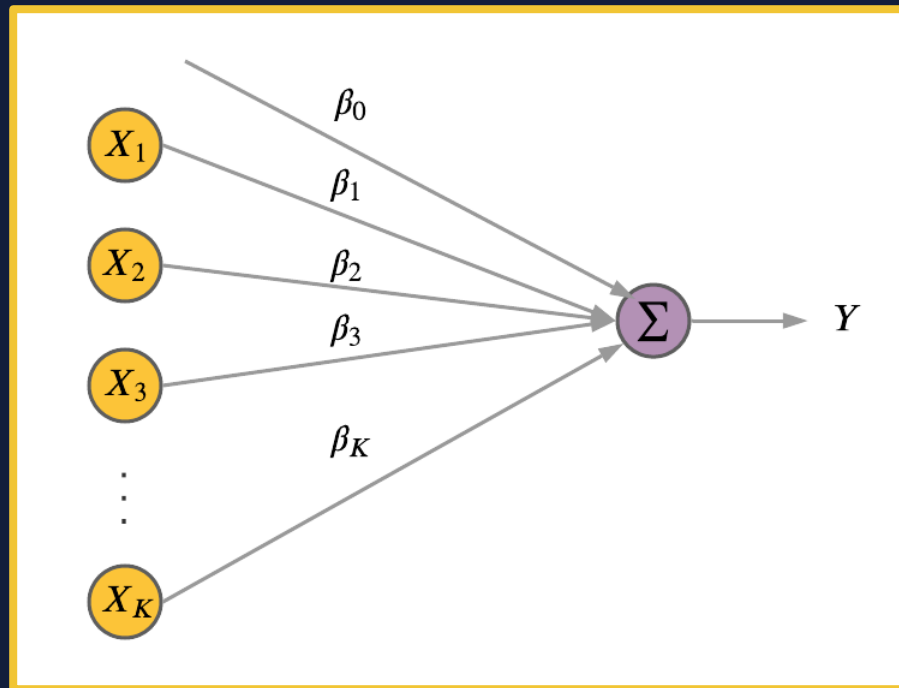
2. Regresión lineal – Fundamentos y modelo

- Regresión lineal simple

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X$$

- Regresión lineal múltiple

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots \beta_K X_K$$

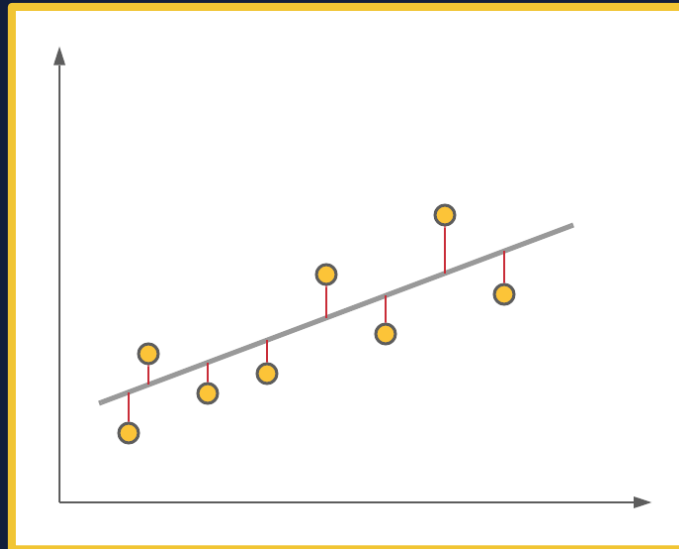


2. Regresión lineal – Entrenamiento

- **Método de minimización de los errores cuadráticos:** si se define el residuo como $e_i = y_i - \hat{y}_i$. La suma de error cuadrático será:

$$H = e_1^2 + e_2^2 + \dots + e_n^2$$

$$H = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_{i1} - \hat{\beta}_2 x_{i2} - \dots - \hat{\beta}_K x_{iK})^2$$



2. Regresión lineal – Entrenamiento

Derivando e igualando a cero, los coeficientes de regresión puede reducirse a utilizar la siguiente expresión:

$$\hat{\beta}_i = - \frac{A_{1,i+1}}{A_{1,1}}$$

Donde $A_{1,i+1}$ es el adjunto al elemento $a_{1,i+1}$ de la matriz de covarianzas:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} S_y^2 & S_{y,x_1} & S_{y,x_2} & \dots \\ S_{x_1,y} & S_{x_1}^2 & S_{x_1,x_2} & \dots \\ S_{x_2,y} & S_{x_2,x_1} & S_{x_2}^2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

La ordenada en el origen $\hat{\beta}_0$ se calcula de manera inmediata:

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}_1 - \dots - \hat{\beta}_k \bar{x}_k$$

2. Regresión lineal – Consideraciones importantes

- Variables escaladas para poder comparar los coeficientes.
- No existen hiperparámetros.
- A mayor valor absoluto de $\hat{\beta}_k$, mayor importancia de la variable en la predicción.
- Coeficientes cercanos a cero implican poco peso en la predicción.
- Se debe medir el rendimiento en el conjunto de test.

2. Regresión lineal – Ejemplo

Y	113	118	127	132	136	144	138	146	156	149
X_1	20	20	25	25	30	30	30	40	40	40
X_2	1	2	1	2	1	2	3	1	2	3

1. El modelo de regresión lineal simple de Y en función de X_1 .
2. El modelo de regresión lineal simple de Y en función de X_2 .
3. El modelo de regresión lineal múltiple de Y en función de X_1 y X_2 .
4. Validar cada modelo con el siguiente conjunto de *test*.

Y	200	116	122	130	150	120	146	155	156	147
X_1	35	25	25	20	35	25	42	35	40	42
X_2	1	2	2	1	2	2	1	1	2	2

2. Regresión lineal – Ejemplo

1. Escalado de variables, vector de medias y matriz de covarianzas.

Y	113	118	127	132	136	144	138	146	156	149
X_1	0	0	0.25	0.25	0.5	0.5	0.5	1	1	1
X_2	0	0.5	0	0.5	0	0.5	1	0	0.5	1

$$\mu_{Y,X_1,X_2} = \begin{pmatrix} 135.9 \\ 0.5 \\ 0.4 \end{pmatrix}$$

$$\Sigma_{Y,X_1,X_2} = \begin{pmatrix} 168.69 & 4.525 & 1.84 \\ 4.525 & 0.1375 & 0.0375 \\ 1.84 & 0.0375 & 0.14 \end{pmatrix}$$

2. Regresión lineal – Ejemplo

1. El modelo de regresión a estimar es $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1$.

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{X_1,Y}}{S_{X_1}^2} = \frac{4.525}{0.1375} = 32.91$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{X}_1 = 135.9 - 32.91 * 0.5 = 119.45$$

$$Y = 119.45 + 32.91X_1$$

2. Regresión lineal – Ejemplo

2. El modelo de regresión a estimar es $Y = \beta_0 + \beta_1 X_2$.

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{X_2, Y}}{S_{X_2}^2} = \frac{1.84}{0.14} = 13.143$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{X}_2 = 135.9 - 13.143 * 0.4 = 130.643$$

$$Y = 130.643 + 13.143X_1$$

2. Regresión lineal – Ejemplo

3. El modelo de regresión a estimar es $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$.

$$\hat{\beta}_i = -\frac{A_{1,i+1}}{A_{1,1}} \rightarrow \begin{cases} \hat{\beta}_1 = -\frac{A_{12}}{A_{11}} = -\frac{-0.5645}{0.018} = 31.636 \\ \hat{\beta}_2 = -\frac{A_{13}}{A_{11}} = -\frac{-0.0833}{0.018} = 4.628 \end{cases}$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{X}_1 - \hat{\beta}_2 \bar{X}_2 = 135.9 - 31.636 * 0.5 - 4.628 * 0.4 = 118.231$$

$$Y = 118.231 + 31.636X_1 + 4.628X_2$$

2. Regresión lineal – Ejemplo

4. Escalamos y obtenemos las predicciones en el conjunto de test.

Y	200	116	122	130	150	120	146	155	156	147
\hat{Y}_{M1}	144.13	127.68	127.68	135.91	144.13	127.68	155.65	144.13	152.36	155.65
\hat{Y}_{M2}	130.64	137.21	137.21	130.64	137.21	137.21	130.64	130.64	137.21	137.21
\hat{Y}_{M3}	141.96	128.45	134.05	144.27	128.45	153.03	153.03	141.96	151.18	155.34

<i>Métrica</i>	<i>MAE</i>	<i>MSE</i>	<i>RMSE</i>	<i>R²</i>
M1	12.548	371.735	19.280	0.3557
M2	20.471	722.990	26.889	0.2230
M3	12.741	399.004	19.975	0.3106

3. Regresión logística – Fundamentos y modelo

- R. logística simple binaria

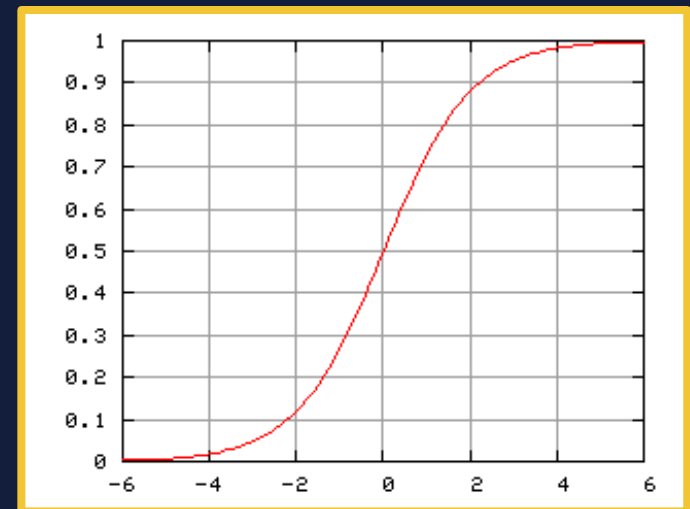
$$p(X) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X}}$$

- R. logística múltiple binaria

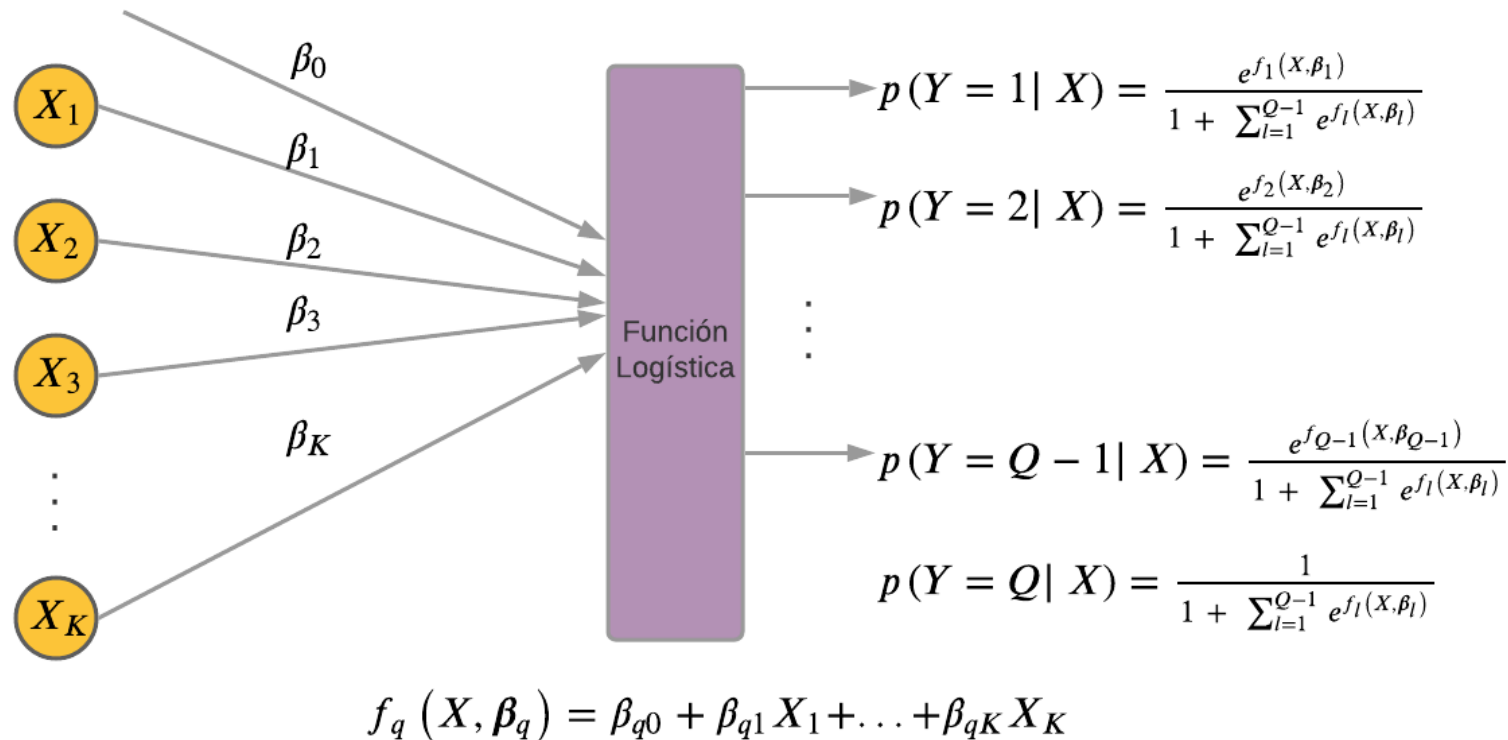
$$p(X) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_K X_K}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_K X_K}}$$

- R. logística múltiple multiclase

$$p(Y = q|X) = \frac{e^{\beta_{q0} + \beta_{q1} X_1 + \dots + \beta_{qK} X_K}}{1 + \sum_{l=1}^{Q-1} e^{\beta_{l0} + \beta_{l1} X_1 + \dots + \beta_{lK} X_K}}$$



3. Regresión logística – Fundamentos y modelo



3. Regresión logística - Entrenamiento

- **Método de máxima verosimilitud:** buscar este método es β_0 y β_1 de forma que $p(X)$ sea lo más cercano a uno cuando el patrón pertenece a la clase positiva y cercano a cero cuando no lo es. Formalmente:

$$l(\beta_0, \beta_1) = \prod_{i: y_i=1} p(x_i) \prod_{i': y_{i'}=0} (1 - p(x_{i'}))$$

3. Regresión logística – Consideraciones importantes

- Nos proporciona un valor de pertenencia de cada patrón a cada clase.
- La suma de las probabilidades de pertenencia a cada clase es 1.
- Patrón predicho a aquella clase con mayor probabilidad de pertenencia.
- Análisis de atributos y coeficientes similar a la regresión lineal.

3. Regresión logística – Ejemplo en base de datos IRIS

$$f_1(\mathbf{X}, \beta_1) = 8.1743 + 21.8065X_1 + 4.5648X_2 - 26.3083X_3 - 43.887X_4$$

$$f_2(\mathbf{X}, \beta_2) = 42.637 + 2.4652X_1 + 6.6809X_2 - 9.4293X_3 - 18.2859X_4$$

1. Hallar las predicciones del modelo para el siguiente conjunto de *test*.
2. Evaluar el rendimiento del clasificador en dicho conjunto.

Patrón	X_1	X_2	X_3	X_4	Clase
1	4.6	3.2	1.4	0.2	1
2	5.3	3.7	1.5	0.2	1
3	5.7	4.4	1.5	0.4	1
4	5.0	3.5	1.6	0.6	2
5	5.5	2.5	4.0	1.3	2
6	5.7	3.0	4.2	1.2	2
7	5.7	2.8	4.1	1.3	3
8	5.8	2.7	5.1	1.9	3
9	6.3	2.5	5.0	1.9	3
10	5.9	3.0	5.1	1.8	3

3. Regresión logística – Ejemplo en base de datos IRIS

1. Se evalúan las funciones, se aplica la transformación logística, se obtienen las probabilidades y se clasifica el patrón.

p	e^{f_1}	e^{f_2}	$\sum e^{f_i}$	$p(Y = 1 X)$	$p(Y = 2 X)$	$p(Y = 3 X)$	Clase predicha	Clase Real
1	4.47E+33	2.54205E+25	4.4693E+33	0.99999999	5.68781E-09	0	1	1
2	1.34E+40	1.56982E+27	1.3435E+40	1	1.16848E-13	0	1	1
3	3.11E+41	1.16638E+28	3.1057E+41	1	3.75565E-14	0	1	1
4	1.33E+28	5.10826E+22	1.3307E+28	0.99999616	3.83863E-06	0	1	2
5	1.3E-10	90127.44471	90127.4447	1.4413E-15	0.999988905	1.1095E-05	2	2
6	5.17E-10	631978.087	631978.087	8.1869E-16	0.999998418	1.5823E-06	2	2
7	2.88E-09	426496.739	426496.739	6.7603E-15	0.999997655	2.3447E-06	2	3
8	2.22E-31	0.000386241	0.00038624	2.2235E-31	0.000386092	0.99961391	3	3
9	6.74E-26	0.000894094	0.00089409	6.7313E-26	0.000893295	0.99910671	3	3
10	6.24E-28	0.022830224	0.02283022	6.0978E-28	0.022320639	0.97767936	3	3

3. Regresión logística – Ejemplo en base de datos IRIS

2. Calculamos la matriz de confusión general, y para cada una de las clases. Después, obtenemos las métricas de rendimiento.

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$CCR = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^J n_{jj} = 80\%$$

$$Kappa = \frac{p_0 - p_e}{1 - p_e} = \frac{CCR - \frac{1}{n^2} \sum_{j=1}^J n_{j\cdot} \cdot n_{\cdot j}}{1 - \frac{1}{n^2} \sum_{j=1}^J n_{j\cdot} \cdot n_{\cdot j}} = \frac{0.8 - 0.33}{1 - 0.33} = 0.70$$

3. Regresión logística – Ejemplo en base de datos IRIS

2. Calculamos la matriz de confusión general, y para cada una de las clases. Después, obtenemos las métricas.

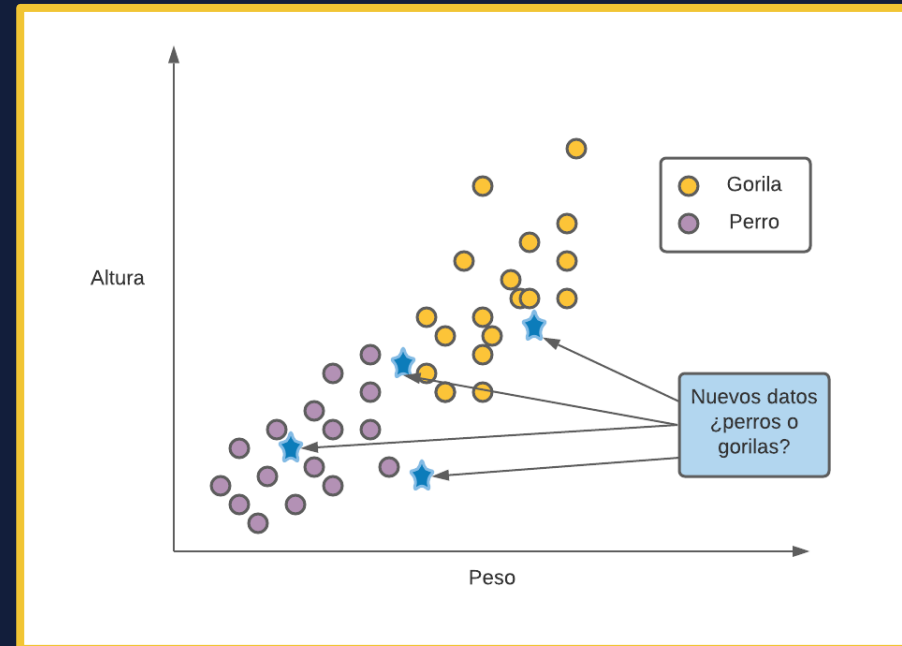
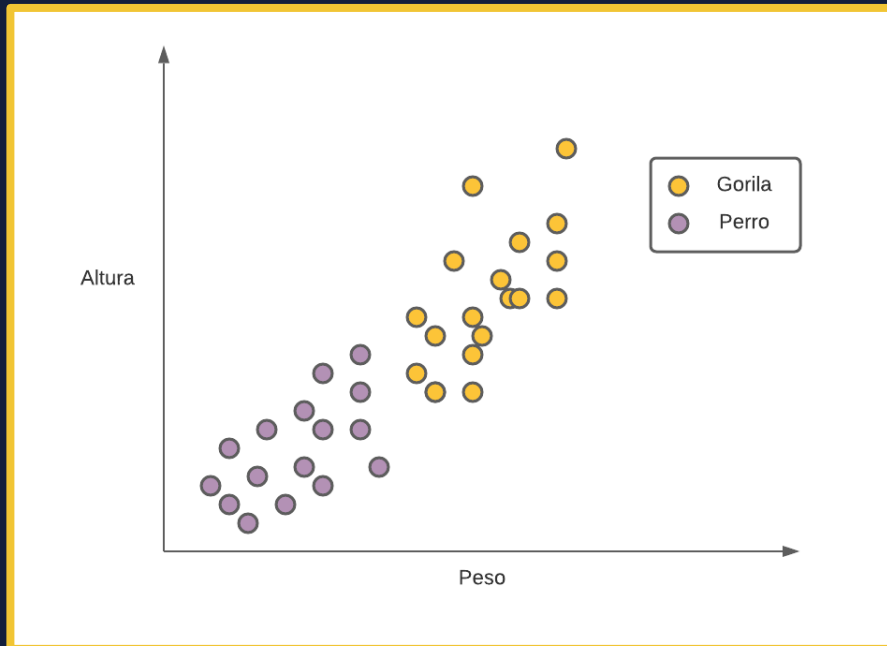
Clase 1: $\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 1 & 6 \end{pmatrix}$

Clase 2: $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 6 \end{pmatrix}$

Clase 3: $\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 0 & 6 \end{pmatrix}$

<i>Clase</i>	<i>Sensibilidad</i>	<i>FP Rate</i>	<i>Especificidad</i>	<i>Precision</i>	<i>F – Score</i>
1	1	0.143	0.857	0.750	0.857
2	0.667	0.143	0.857	0.667	0.667
3	0.750	0	1	1	0.857
Promedio	0.806	0.095	0.905	0.806	0.794

4. KNN – Fundamentos, modelo y entrenamiento



4. KNN – Fundamentos, modelo y entrenamiento

Distancias

- **Distancia euclídea:** raíz cuadrada de las diferencias al cuadrado de sus coordenadas.

$$d_E(X_1, X_2) = \sqrt{\sum_{i=1}^K (X_{1i} - X_{2i})^2}$$

- **Distancia Manhattan:** suma de las diferencias absolutas de sus coordenadas.

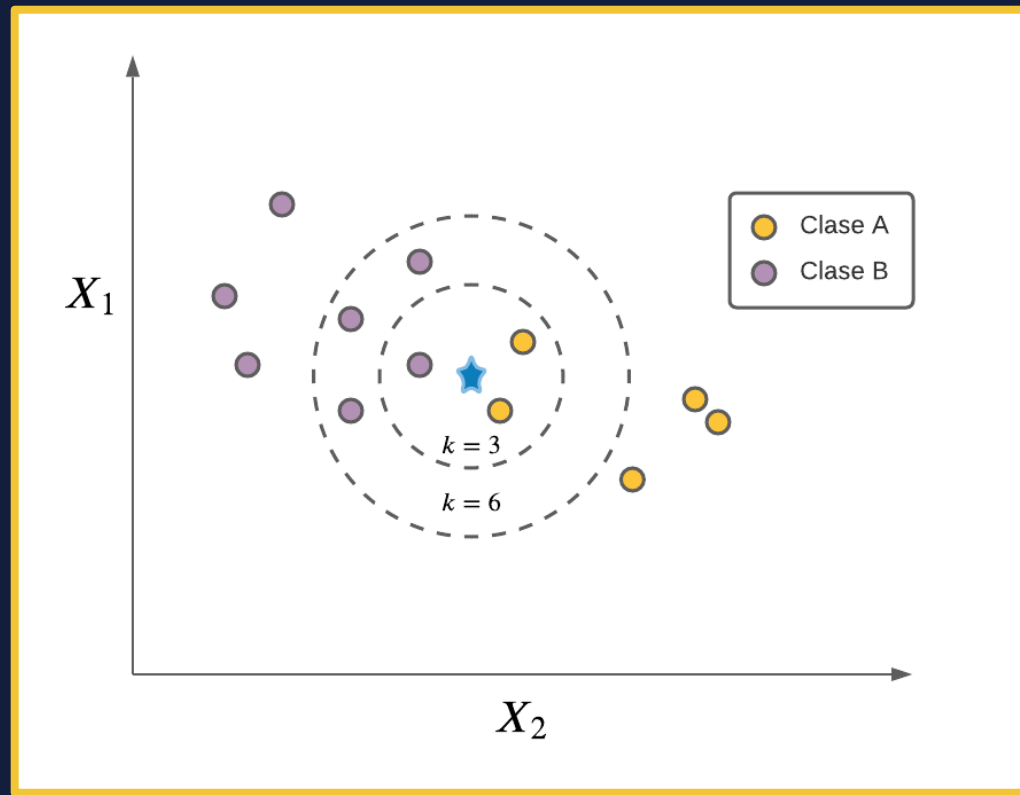
$$d_M(X_1, X_2) = \sum_{i=1}^K |X_{1i} - X_{2i}|$$

- **Distancia Ajedrez:** mayor de sus diferencias a lo largo de cualquiera de sus dimensiones coordenadas.

$$d_A(X_1, X_2) = \max_{i=1}^K (|X_{1i} - X_{2i}|)$$

4. KNN – Fundamentos, modelo y entrenamiento

Valor de k



4. KNN – Consideraciones importantes

- Principio de funcionamiento muy simple.
- No tiene entrenamiento.
- Funciona para regresión y clasificación.
- Se necesita estimar el parámetro k y la métrica de distancia.
- Alto coste computacional en la predicción.
- No es bueno a mayor número de características de los patrones.
- Con características categóricas el rendimiento es peor.

4. KNN – Ejemplo

Para un problema de clasificación binaria y con tres características se han recogido los siguientes patrones de entrenamiento.

Patrón	X_1	X_2	X_3	Clase
1	4.6	3.2	1.4	1
2	5.3	3.7	1.5	1
3	5.7	4.4	1.5	1
4	5.0	3.5	1.6	2
5	5.5	2.5	4.0	1
6	5.7	3.0	4.2	2
7	5.7	2.8	4.1	2
8	5.8	2.7	5.1	1
9	6.3	2.5	5.0	2
10	5.9	3.0	5.1	2

Se pide:

1. Hallar las predicciones del modelo para el siguiente conjunto de *test*, teniendo en cuenta el valor de $k = 3$ vecinos y la distancia euclídea.
2. Evaluar el rendimiento del clasificador en dicho conjunto.

Patrón	X_1	X_2	X_3	Clase
1	5	3.5	1.7	1
2	4.3	2.8	1.5	1
3	2.7	4.5	1.2	1
4	5.0	4.2	1.3	1
5	6.3	2.5	4.1	1
6	5.2	3.0	4.5	2
7	4.5	3	4.2	2
8	5.9	2.9	5.2	2
9	5	2.4	5.1	2
10	4.5	3.2	5.0	2

4. KNN – Ejemplo

1. Cálculo de distancias y predicciones

	Patrón entrenamiento											
P. test	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Clase predicha	Clase Real
1	0,5831	0,4123	1,1576	0,1	2,5573	2,6439	2,5962	3,5833	3,6851	3,5525	1	1
2	0,5099	1,3454	2,126	0,995	2,7893	3,048	2,953	3,9013	4,0423	3,9446	1	1
3	2,3108	2,7368	3,0166	2,5397	4,4362	4,5	4,5056	5,2972	5,6036	5,2631	1	1
4	1,0817	0,6164	0,755	0,7616	3,2296	3,2156	3,2078	4,1629	4,2743	4,0853	1	1
5	3,2665	3,0332	3,2757	2,99	0,8062	0,7874	0,6708	1,1358	0,9	1,1874	2	1
6	3,1639	3,0822	3,3481	2,9496	0,7681	0,5831	0,6708	0,9	1,3077	0,922	2	2
7	2,8089	2,9017	3,2696	2,6944	1,1358	1,2	1,2207	1,6093	2,0322	1,6643	2	2
8	4,0274	3,8328	3,9975	3,759	1,3266	1,0247	1,1225	0,2449	0,6	0,1414	2	2
9	3,8066	3,8393	4,1773	3,6688	1,2124	1,2884	1,2845	0,8544	1,3077	1,0817	1	2
10	3,6014	3,6249	3,8897	3,4496	1,578	1,456	1,5524	1,3964	1,9313	1,4177	2	2

4. KNN – Ejemplo

2. Cálculo de métricas de rendimiento

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$$

$$CCR = \frac{TP + TN}{N} = 0.8$$

$$Sensibilidad = \frac{TP}{TP + FN} = 0.8$$

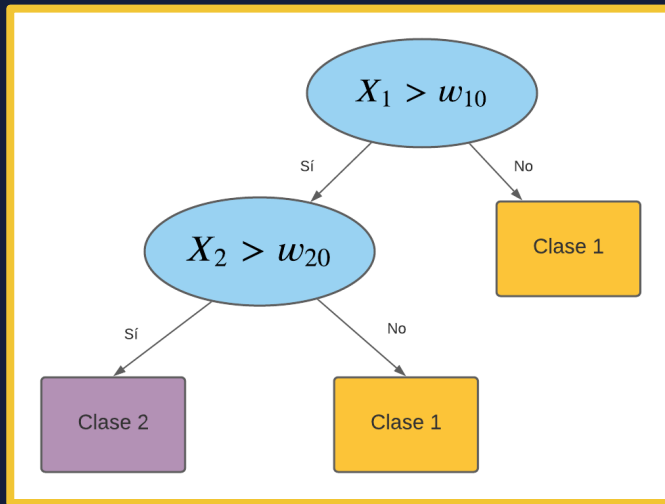
$$FP\ Rate = \frac{FP}{TN + FP} = 0.2$$

$$Especificidad = \frac{TN}{TN + FP} = 0.8$$

$$Precisión = \frac{TP}{TP + FP} = 0.8$$

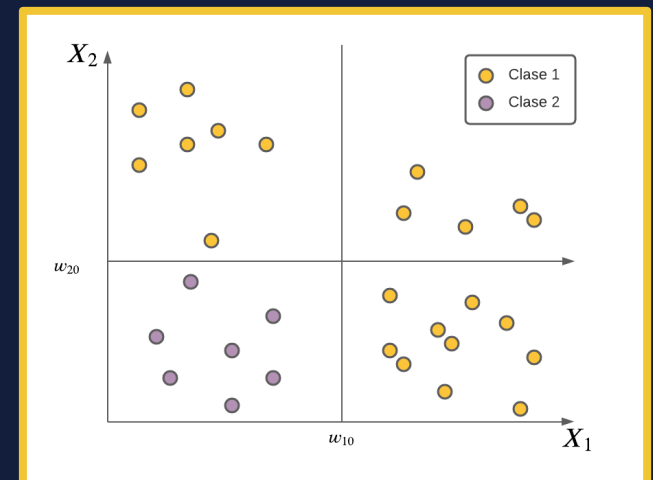
$$F1 - Score = \frac{2TP}{2TP + FP + FN} = 0.8$$

5. Árboles de decisión – Fundamentos y modelo

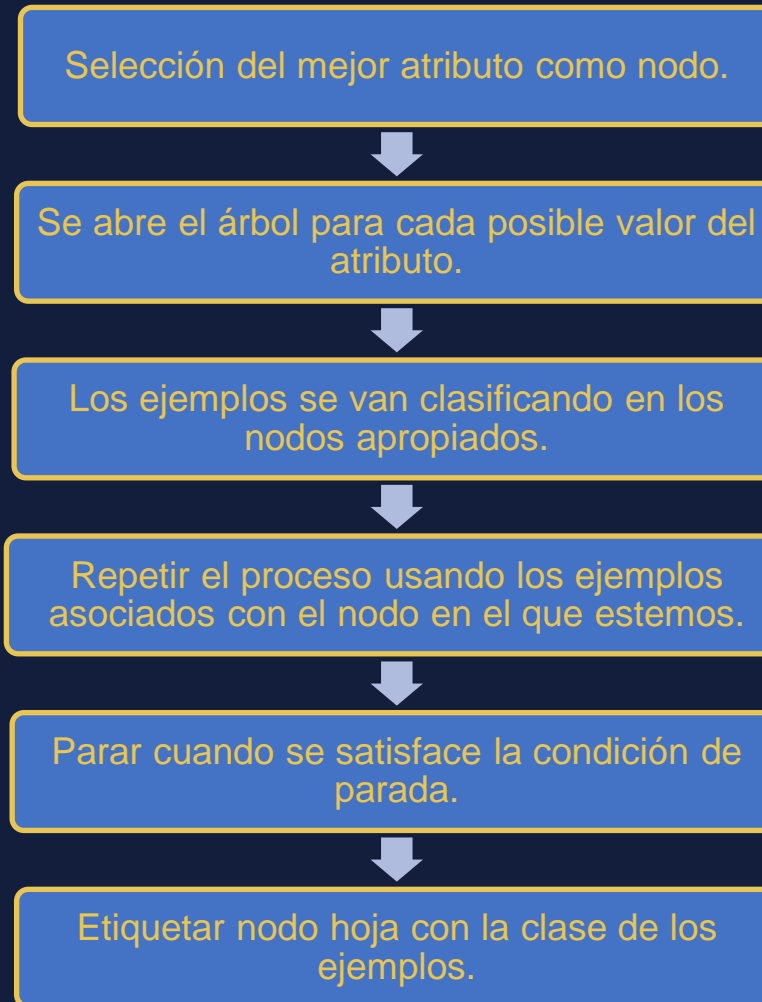


- **Nodos no terminales:** decisión a tomar.
- **Ramas:** posibles valores de los atributos.
- **Nodos hoja:** clase o valor a predecir.

- **R1:** Si $X_1 > w_{10}$ Entonces Clase 1.
- **R2:** Si $X_1 < w_{10}$ Y $X_2 > w_{20}$ Entonces Clase 1.
- **R3:** Si $X_1 < w_{10}$ Y $X_2 < w_{20}$ Entonces Clase 2.



5. Árboles de decisión – Entrenamiento



5. Árboles de decisión – Entrenamiento

Los árboles de decisión son muy susceptibles al **sobreentrenamiento**, es decir, hacer que el modelo crezca con el objetivo de clasificar correctamente todos los ejemplos de entrenamiento, provocando un peor desempeño en la generalización. Para este problema se aplican dos técnicas de poda:

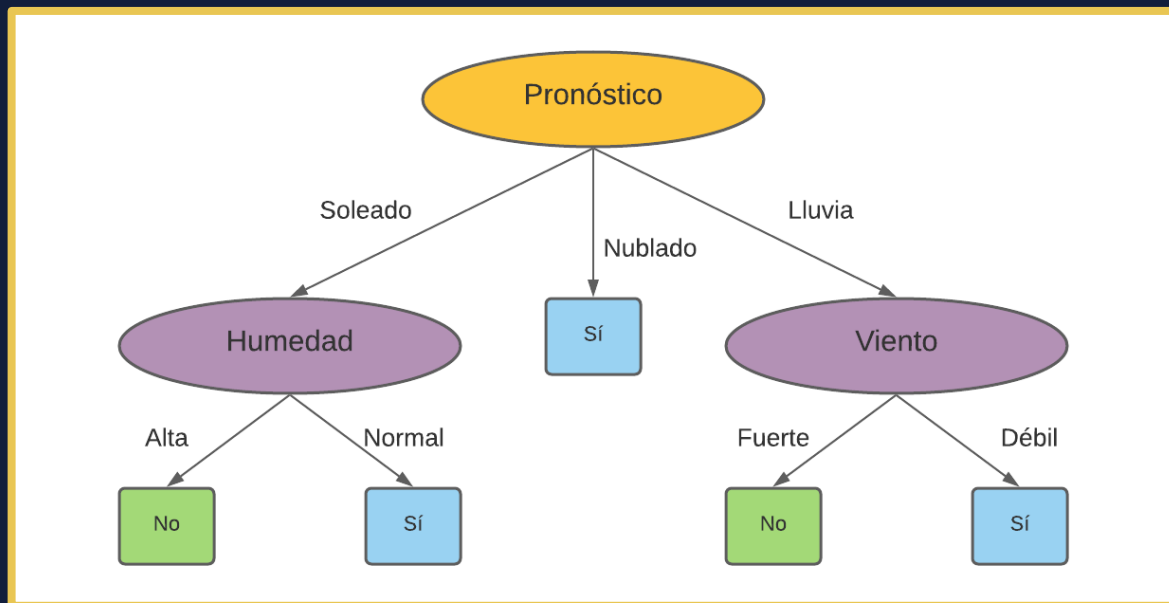
- **Pre-poda:** para de aumentar el árbol antes de que alcance el punto en el que clasifica perfectamente los ejemplos de entrenamiento. Es difícil estimar cuándo hacerlo. Se aplican métodos como tests estadísticos para estimar si expandiendo un nodo particular es probable producir una mejora más allá del conjunto de entrenamiento.
- **Post-poda:** permitir que se sobreajuste los datos, y después podar el árbol reemplazando subárboles por una hoja. Es mejor en la práctica, pero también es más costoso computacionalmente.

5. Árboles de decisión – Consideraciones importantes

- Se representan mediante árboles compuestos por nodos no terminales, ramas y nodos hoja.
- Alta interpretabilidad → aplicaciones en problemas reales.
- Robustos a datos con ruidos.
- Algunos árboles permiten valores perdidos.
- Admiten características de tipo categórico.
- Modelos no lineales.
- No son muy sensibles a hiperparámetros.
- Sobreentrenamiento.
- Se debe evitar que crezcan demasiado.

5. Árboles de decisión – Ejemplo

Determinar si se juega o no al tenis en función de cuatro características.



1. Hallar las predicciones del modelo para el conjunto de datos siguiente.
2. Evaluar el rendimiento del clasificador.

5. Árboles de decisión – Ejemplo

1. Realizamos las predicciones

Día	Pronóstico	Temperatura	Humedad	Viento	Predicción	Jugar
1	Soleado	Calor	Alta	Débil	No	No
2	Soleado	Calor	Alta	Fuerte	No	No
3	Lluvia	Media	Alta	Débil	Sí	Sí
4	Lluvia	Frío	Normal	Débil	Sí	Sí
5	Nublado	Frío	Normal	Fuerte	Sí	Sí
6	Soleado	Media	Alta	Débil	No	No
7	Lluvia	Media	Normal	Débil	Sí	No
8	Soleado	Media	Normal	Fuerte	Sí	Sí
9	Nublado	Calor	Normal	Débil	Sí	Sí
10	Lluvia	Media	Alta	Débil	Sí	No

5. Árboles de decisión – Ejemplo

2. Cálculo de las métricas de rendimiento

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$CCR = \frac{TP + TN}{N} = 0.8$$

$$Sensibilidad = \frac{TP}{TP + FN} = 1$$

$$FP\ Rate = \frac{FP}{TN + FP} = 0.4$$

$$Especificidad = \frac{TN}{TN + FP} = 0.6$$

$$Precisión = \frac{TP}{TP + FP} = 0.71$$

$$F1 - Score = \frac{2TP}{2TP + FP + FN} = 0.83$$

MUCHAS GRACIAS POR SU ATENCIÓN



aduran@grupomainjobs.com



Antonio Manuel Durán Rosal

<https://www.linkedin.com/in/antonio-manuel-dur%C3%A1n-rosal-99ba92a5/>



twitter.com/eiposgrados



facebook.com/eiposgrados



instagram.com/eiposgrados